



Gradua: Farmazia Ikasturtea: 1 Taldea: 31 Data: 2013/06/26

Ikasgaia: Kimika Orokorra eta Ez-organikoa

Izen-abizenak _____

1. Ondoko ekuazioetatik bat hidrogeno atomoren Schrödinger-en ekuazioa da. Zein? **b ekuazioa**

a)
$$E_R = -K \frac{N_A A |Z_1| |Z_2| e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

b)
$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 r} \right] \psi = E \psi$$

Aukeratu duzun ekuazioan, batugai bakoitzak zer adierazten duen azaldu laburki

$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$	Batugai hau elektroien energia zinetikoari dagokio
$-\frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 r}$	Batugai hau elektroien energia potentzialari dagokio

Hidrogenoaren nukleoan protoi bat baino ez dago. Beraz, hidrogenoaren elektro bakar horrek duen energia osoa, zinetikoa (higitzen dabilelako) eta potentziala (protoiarekiko erakarpin indarpean dagoelako) da. Energia horiek hartzen dira kontuan Schrödinger-en ekuazioan, elektroien-uhin funtzioa eta energia kuantizatua kalkulatzeko egoera baimendu bakoitzean. Egoera baimenduak (n,l,m) kuantu-zenbakien hirukote baten bidez definitzen dira.

Aukeratu ez duzun ekuazioak nola du izena? Zer kalkulatu da ekuazio horren bidez? Azaldu laburki

$$E_R = -K \frac{N_A A |Z_1| |Z_2| e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

Ekuazio hau Born-Mayer-en ekuazio da. Ekuazio horren bidez sare-energia kalkulatu da sare ionikoetan. Horretarako behar diren datuak hauexek dira:

A, Madelung-en konstantea (sarearen geometriarekin du zerikusia)

Z₁ eta Z₂ ioien kargak dira (katioiarena eta anioiarena)

r₀, lotura-distantzia; alegia, katioiaren eta anioiaren arteko distantzia

n, Born-en berretzailea (ioien konfigurazio elektronikoarekin du zerikusia)

2. Ondoko orbital-taldeetatik batzuk degeneratuak dira; beste batzuk, ordea, ez. Aukeratu aukera egokia kasu bakoitzean.

	Ez
Bai	
Bai	
	Ez
	Ez

Hidrogeno atomoan: 1s, 2s, 3s

Burdin atomoan 3p_x, 3p_y, 3p_z

Hidrogeno atomoan: 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z

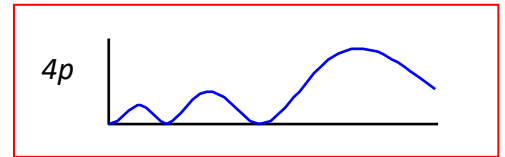
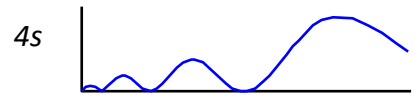
Litio atomoan 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z

Aluminio atomoan 3s, 3p_x, 3p_y, 3p_z

Hidrogeno atomoan “n” bereko orbitalak dira degeneratuak. Atomo polielektronikoetan, “n” eta “l” bereko orbitalak dira degeneratuak.

3. Ondoko grafikoa hidrogeno atomoaren 4s orbitalaren banaketa erradialaren funtzioa ikus daiteke irudikatuta r-ren aurrean (non r elektroien eta nukleoaren arteko distantzia baita)

4p dagokion orbitalaren banaketa erradialaren funtzioa irudikatu, eta azaldu laburki

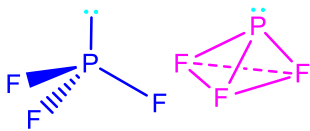


4s banaketa erradialaren funtzioak lau maximo ditu; 4p banaketa erradialaren funtzioak, berriz, hiru.

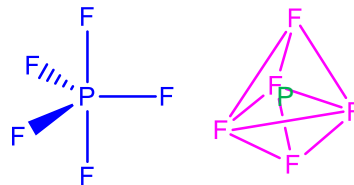
Grafiko biak konparatzean ateratzen diren ondorioak azaldu laburki

Gainera, maximo altuena 4p funtzioan 4s funtzioarena baino gertuago dago nukleotik (denboraren batez bestean dagokion probabilitatearen berri ematen duena). Halaber, 4s funtzioak badu nukleotik gertuen egoteko probabilitate bat, txikia bada ere, une jakin batean.

4. BGEBA metodoa erabiliz azaldu PF_3 eta PF_5 konposatuen geometria. Atomo guztien karga formal eta oxidazio-egoerak adierazi. Hibridazioa ere proposatu.



PF_3 : 26 elektro
 $\text{AB}_4 (\text{AX}_3\text{E})$
 molekula piramidala



PF_5 : 40 elektro
 $\text{AB}_5 (\text{AX}_5)$
 molekula bipiramide-trigonal

Hibridazioa: sp^3

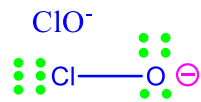
Hibridazioa: dsp^3

karga formala							
PF_3	Elektroiak atomo isolatuan	-	Atomoaren elektroiek molekulan	+	Lotura - kopurua	=	Karga formala
P	5	-	8	+	3	=	0
F	7	-	8	+	1	=	0
PF_5	Elektroiak atomo isolatuan	-	Atomoaren elektroiek molekulan	+	Lotura - kopurua	=	Karga formala
P	5	-	10	+	5	=	0
F	7	-	8	+	1	=	0

oxidazio-egoera					
PF_3	Elektroiak atomo isolatuan	-	Atomoaren kontrolpean dauden elektroiek, molekulan	=	oxidazio-egoera
P	5	-	2	=	+3
F	7	-	8	=	-1
PF_5	Elektroiak atomo isolatuan	-	Atomoaren kontrolpean dauden elektroiek, molekulan	=	Karga formala
P	5	-	0	=	+5

F	7	-	8	=	-1
---	---	---	---	---	----

5. Balentzia-loturaren teoria erabiliz, azaldu hipoklorito, klorito, klorato eta perklorato ioien geometria eta egitura erresonanteak Atomo guztien karga formal eta oxidazio-egoerak adierazi.



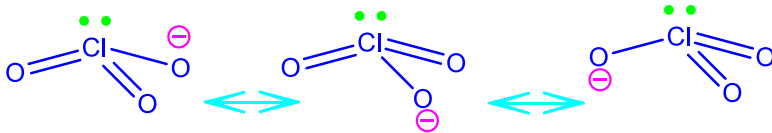
7+6+1=14 elektroi

ClO_2^- ioi angeluarra, AB_4 , AX_2E_2 , sp^3 hibridazioa

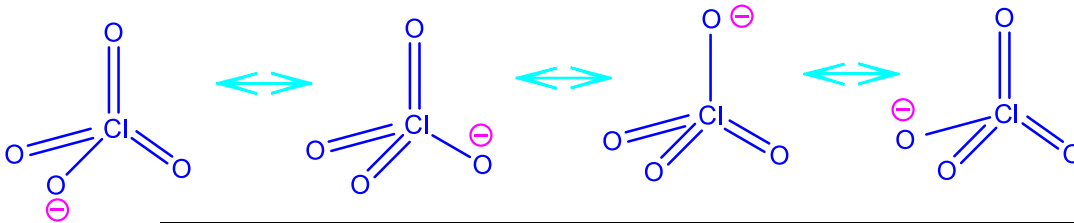


7+2*6+1=20 elektroi

ClO_3^- ioi piramidala, AB_4 , AX_3E , sp^3 hibridazioa 7+3*6+1=26 elektroi



ClO_4^- ioi tetraedrikoa, AB_4 , AX_4 , sp^3 hibridazioa 7+4*6+1=32 elektroi



karga formal							
	Elektroiak atomo isolatuan	-	Atomoaren elektroiak molekulan	+	Lotura - kopurua	=	Karga formal
Cl (ClO^-)	7	-	8	+	1	=	0
Cl (ClO_2^-)	7	-	10	+	3	=	0
Cl (ClO_3^-)	7	-	12	+	5	=	0
Cl (ClO_4^-)	7	-	14	+	7	=	0
O(O=)	6	-	8	+	2	=	0
O(O-)	6	-	8	+	1	=	-1

oxidazio-egoera					
PF_3	Elektroiak atomo isolatuan	-	Atomoaren kontrolpean dauden elektroiak, molekulan	=	oxidazio-egoera
Cl (ClO^-)	7	-	6	=	+1
Cl (ClO_2^-)	7	-	4	=	+3
Cl (ClO_3^-)	7	-	2	=	+5
Cl (ClO_4^-)	7	-	0	=	+7
O (O= eta O-)	6	-	8	=	-2

6. Ondoko orbital molekularren diagrama molekula-mota bati dagokio.

Hautatu ondoko aukeretatik egokia(k)

- Molekula diatomiko ionikoak
- **Molekula diatomiko heteronuklearrak**
- Molekula polar lauak
- Molekula apolar lauak

Zure erantzunaren arabera, erabaki diagrama hori egokia den karbono monoxido edo/eta dioxigeno molekulen konfigurazioa azaltzeko.

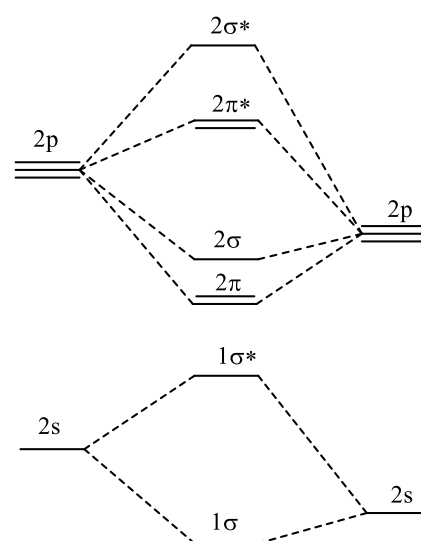
CO-ren konfigurazio elektronikoa azaltzeko egokia da, bietatik O atomoa elektronegatiboena delarik

Aukeratutako molekul(ar)en konfigurazio elektronikoa idatzi eta lotura ordena kalkulatu

CO (4+6=10 elektroik)

$(1\sigma)^2(1\sigma^*)^2(2\pi)^2(2\pi)^2(2\sigma)^2$

Lotura-ordena = $(8-2)/2=3$



Aukeratutako molekul(ar)en portaera magnetikoa azaldu laburki.

Molekula diamagnetikoa da, elektroik guztiak parekatuta daude, eta beraz ezin du erantzunik eman eremu magnetiko baten barruan.

7. Metal lurralkalinoen portaera elektrikoa azaldu laburki (irudi bat marraztu hori azaltzeko).

Metal lurralkalinoak, metal guztiak bezalaxe, eroale elektrikoak dira.

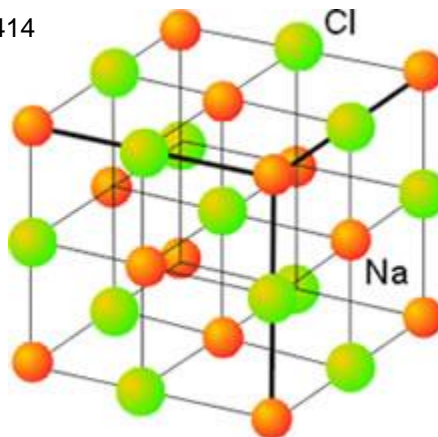


Metalurralkalinoetan, balentzia-banda beterik dago atomo bakoitzeko 2 elektroi daudelako (ns^2).

Eroankortasuna ahalbidetzen da, eroapen-banda eta balentzia-banda gainezarrira daudelako. Horrela elektroiak erraz pasa daitezke balentzia-bandatik eroapen-bandara.

8. Potasio bromuroak NaCl sarean kristaltzen du, NaCl sareari dagozkion erradioen erlazioaren mugabarioak ondokoak direlarik: $0.732 > r^+ / r^- > 0.414$

a) Sare unitatea irudikatu



b) Potasio bromuroak betetzen al ditu r^+ / r^- parametroaren arabeko aurreikuste teorikoak? Azaldu ondoko datuak kontuan hartuz.

$$r_{\text{atomikoa}}(\text{K}) = 2.35 \text{ \AA} \quad r_{\text{ionikoa}}(\text{K}^+) = 1.33 \text{ \AA} \quad r_{\text{atomikoa}}(\text{Br}) = 1.14 \text{ \AA} \quad r_{\text{ionikoa}}(\text{Br}^-) = 1.95 \text{ \AA}$$

$$\frac{r(\text{K}^+)}{r(\text{Br}^-)} = \frac{1.33}{1.95} = 0.68 \quad \text{beraz, KBr konposatu ionikoak aurreikuste teorikoak betetzen ditu}$$

($0.732 > 0.68 > 0.414$)

Horrek esan nahi du, KBr konposatua deskribatzeko solido ionikoetan erabiltzen dugun eredua aplikatu dezakegula. Izan ere, ioiak esferikoak eta deformaezinak direla onar dezakegu. Gainera, pentsa dezakegu anioitik katioira dagoen transferentzia elektroniko altua dela, kobalentetasun maila txikia baita.

9. Ondoko ezkerreko zutabetan bost baieztapen daude. Baieztapen bakoitza eskuineko sustantzia bati dagokio. Gezien bidez, erlazionatu baieztapenak eta sustantziak

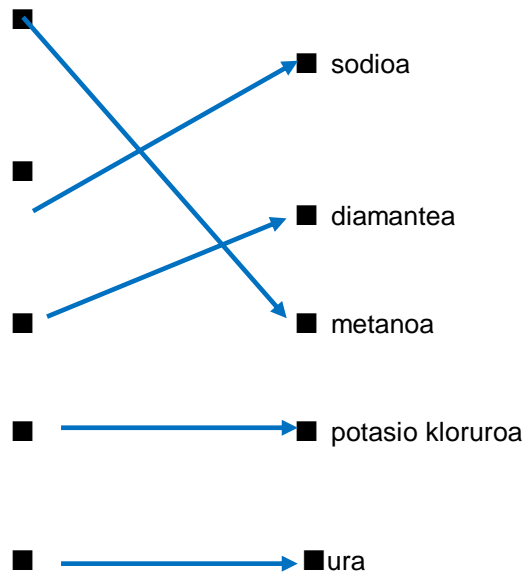
Sustantzia gaseosoa da giro-temperaturan. Solido egoeran dagoenenean Van der Waals motako kohesio-indarrak daude molekulen artean.

Sustantzia honek eroankortasun elektriko altua du, eta bere fusio-puntua 200°C-koa da gutxi gora behera.

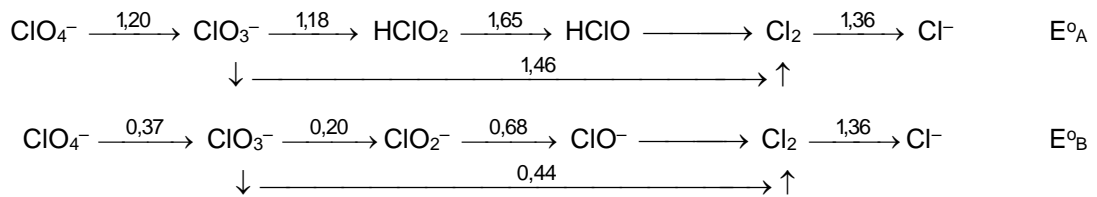
Sustantzia kobalentea da, fusio-puntu altua duena.

Sustantzia isolatzaile elektrikoa da; solido egoeran, fusio-temperaturatik gora, baina, eroalea da. Disolbatuz gero, eroalea da ere.

Giro-temperaturan sustantzia hau likidoa da, eta hidrogeno-lotura sendoak daude molekulen artean.



10. Ondokoak dira kloroaren Latimer-en diagramak ingurune azidoan eta basikoan.



a) Erredukziozko potentzialak kalkulatu hipokloritotik diklorora ingurune bietan.

	VII	V	III	I	0	-1
i. azidoa	ClO_4^-	ClO_3^-	HClO_2	HClO	Cl_2	Cl^-
i. basikoa	ClO_4^-	ClO_3^-	ClO_2^-	ClO^-	Cl_2	Cl^-

Ingurune azidoan: $\text{HClO}_3/\text{Cl}_2$

Ingurune basikoan: $\text{ClO}_3^-/\text{Cl}_2$

$$1.46 = \frac{1.18 \cdot 2 + 1.65 \cdot 2 + 1 \cdot x}{5} \quad x=1.64$$

$$0.44 = \frac{0.20 \cdot 2 + 0.68 \cdot 2 + 1 \cdot x}{5} \quad x=0.44$$

b) Cl_2/Cl^- bikoteari dagokion erredukziozko potentzialak balio bera du ingurune bietan. Azaldu zergatia.

Cl_2/Cl^- bikote honen artean dagoen elektroien trukean ez dago pH-rekiko mendekotasunik.

c) Cl_2 espeziea ez da egonkorra ingurune bietan. Azaldu zein ingurunetan da egonkorra eta zergatik. Cl_2 ingurune azidoan da egonkorra ($1.64 > 1.36$). Basikoan, berriz, dismutatu egiten da ($0.44 < 1.36$).

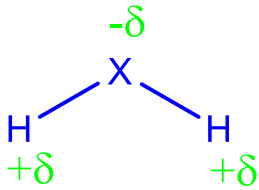
d) Espezie batzuk dismutatzen dira. Zeintzuk?

HClO_2 ingurune azidoan

ClO_2^- eta Cl_2 ingurune basikoan

11. Ondoko espezieak ordenatu azidotasunaren arabera (azidoenetik basikoenera). Azaldu laburki.

H₂O, H₂S, H₂Se eta H₂Te



Hidruro triatomikoak dira, non X atomoaren elektronegatibotasuna beherakorra da O-tik Te-ra. Beraz, H₂O-tik H₂Te-ra X-H loturen polartasuna jaisten da, eta horrela azidotasuna ere jaisten da.



12. Merkurio(II) sulfuroak erreakzionatzen du azido nitrikoarekin, azido klorhidrikoan, eta sortzen diren produktuak Hg[HgCl₄], azufrea eta nitrogeno monoxidoa.

Erreakzio horren bidez 2g Hg[HgCl₄] lortu nahi dira, etekina %85a izanik.

Masa atomikoak: H=1; Cl=35,45; S=32; Hg=200,59

a) Erreakzioa idatzi



b) Behar den merkurio(II) sulfuroaren masa kalkulatu

Pm (HgS) = 232.65 g



$$2 \text{ g Hg}[\text{HgCl}_4] \frac{1 \text{ mol Hg}[\text{HgCl}_4]}{542,98 \text{ g Hg}[\text{HgCl}_4]} \frac{3 \text{ mol HgS}}{1,5 \text{ mol Hg}[\text{HgCl}_4]} \frac{232,65 \text{ g HgS}}{1 \text{ mol HgS}} \frac{100}{85} = 2,02 \text{ g HgS}$$

c) Behar den azido nitrikoaren bolumena kalkulatu, bere kontzentrazioa 0.2 M-ekoa izanik.



$$2 \text{ g Hg}[\text{HgCl}_4] \frac{1 \text{ mol Hg}[\text{HgCl}_4]}{542,98 \text{ g Hg}[\text{HgCl}_4]} \frac{2 \text{ mol HNO}_3}{1,5 \text{ mol Hg}[\text{HgCl}_4]} \frac{100}{85} = 5,778 \times 10^{-3} \text{ mol HNO}_3$$

$$V(\text{HNO}_3) = \frac{5,778 \times 10^{-3} \text{ mol HNO}_3}{0,2 \text{ M}} = 28,89 \times 10^{-3} \text{ L HNO}_3 = 28,89 \text{ mL HNO}_3$$

d) Lortzen den nitrogeno monoxidoaren bolumena kalkulatu, temperatura 50°C izanik eta presioa, 700 Torr.



$$2 \text{ g Hg[HgCl}_4] \frac{1 \text{ mol Hg[HgCl}_4]}{542,98 \text{ g Hg[HgCl}_4]} \frac{2 \text{ mol NO}}{1,5 \text{ mol Hg[HgCl}_4]} = 4,911 \times 10^{-3} \text{ mol HNO}_3$$

$$\frac{700 \text{ torr}}{760 \text{ torr-atm}^{-1}} V = 4,911 \times 10^{-3} \text{ mol} \times 0,082 \frac{\text{L-atm}}{\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}} \times (273 + 50)\text{K} = 0,414 \text{ L NO} = 414 \text{ mL NO}$$

13. Amoniako disoluzio bat daukagu zeinaren pHa 10.97 baita ($K_a = 10^{-9.24}$)

a) Zein da disoluzio honen molaritatea?



NH₃ protolito nagusia denez

$$K_b = \frac{[\text{OH}^-]^2}{c(\text{NH}_3)}$$

$$\boxed{c(\text{NH}_3) = 0.05 \text{ M}}$$

a) Aurreko disoluzioaren 10 mL eta azido klorhidriko disoluzio baten 5 mL nahastuz gero (0.05 M), zein da disoluzio berri honen pHa?

NH ₃	HCl	NH ₄ ⁺	Cl ⁻
0.5 mmol	0.25 mmol		
0.25 mmol	-	0.25 mmol	0.25 mmol

NH₃ eta NH₄⁺ elkarrekin antzeko kontzentrazioa daudenez, disoluzio indargetzailea

$$K_b = \frac{c(\text{NH}_4^+) [\text{OH}^-]}{c(\text{NH}_3)}$$

$$\boxed{\text{pH} = 9.24}$$

c) Aurreko (b ataleko) disoluzioa eta azido klorhidriko disoluzio baten 5 mL nahastuz gero (0.05 M), zein da disoluzio berri honen pHa?

NH ₃	HCl	NH ₄ ⁺	Cl ⁻
0.25 mmol	0.25 mmol	0.25 mmol	0.25 mmol
	-	0.5 mmol	0.5 mmol

NH₄⁺ protolito nagusia denez

$$K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{c(\text{NH}_4^+)}$$

$$\boxed{\text{pH} = 5.42}$$

